

# Справка за основните научни приноси на проф. дфн Изак М. Бивас във връзка с участието му в конкурса за член-кореспондент на БАН

## 1. Механични и механоелектрични свойства на нематични течни кристали

Предложено е обяснение за мътността на нематичните течни кристали в макроскопични количества, основано на модифициране на израза за плътността на енергията на деформация на полето на директора на кристала. Модифицирането позволява образуването на повърхности, върху които е възможно скокообразно изменение на предпочитаното направление.

Намерени са връзки между квадруполния момент и асиметрията на молекулите, изграждащи течния кристал, и стойностите на флексокоэффициентите му.

Изследвани са повърхнинни флексоелектрични домени в нематичен течен кристал при слаба връзка на кристала със стените на клетката и влиянието на постоянно и променливо електрично поле върху характеристиките на домовете. Тези приноси се съдържат в публикациите с номера 1, 3, 4, 41, 42 от списъка на публикациите.

## 2. Фазово поведение на водни разтвори на повърхностноактивни вещества

Изследвано е изменението на критичната концентрация на мицелообразуване на повърхностноактивно вещество, разтворено във вода, при наличие на примес.

Изследван е експериментално главният фазов преход гел—течнокристална фаза на конкретен гликолипид (цереброн). На базата на получените експериментални данни са определени някои характеристики на структурните изменения, настъпващи при фазовия преход, в частност честотата на появата на дефекти в хидрофобните вериги на изследваното вещество.

Определена е фазовата диаграма на двойната система нейонен детергент (Triton-X-114)—вода в широк температурен интервал и широк концентрационен интервал на детергента. Получени са областите на двуфазно равновесие ламеларна фаза—изотропна фаза и е показано че диаграмата съдържа евтектична точка.

Проведено е експериментално изследване на оптичната анизотропия, индуцирана от електрично поле, в суспензия от плътно пакетирани гигантски липидни везикули.

Сравнена е електричната проводимост на везикуларни суспензии, приготвени по различни методи.

Тези приноси се съдържат в публикациите с номера 9, 12, 14, 21, 43, 57, 58 от списъка на публикациите.

## 3. Моделиране на липиден бислои

Развит е статистикомеханичен модел на липиден бислои. При изчисляване на взаимодействията между хидрофобните вериги на липидните молекули е използвано приближението на средното поле. С помощта на този модел са изчислени параметрите на порядък на метиленовите групи на алкилните вериги на липидните молекули, механичните характеристики на мембраната и разпределението на страничното налягане по дебелината ѝ.

Показано е, че изменението на повърхнинната енергия на интерфейса вода—масло при огъването му влияе върху еластичността на огъване на липиден бислои.

Направена е Монте-Карло симулация на хидрофобното ядро на липиден монослой, с помощта на която е изчислен модулът му на еластичност на разтягане.

Тези приноси се съдържат в публикациите с номера 2, 5, 8, 15, 18 от списъка на публикациите.

## 4. Флексоэффект в мембрани

Изследвано е флексоелектричното взаимодействие между две мембрани в резултат на термичните им флуктуации. Предсказано е, че при достатъчно голяма

стойност на флексокоэффициента ще възникне фазов преход, при който силите на привличане вследствие флексоелектричното взаимодействие ще нарастнат със скок и ще възникнат статични деформации на мембраните. Въз основа на това е дадено едно възможно обяснение за произхода на огънатата ламеларна фаза.

Изчислен е приносът на електричните двойни слоеве, възникващи при наличие на заряд върху повърхностите на мембраната, към флексокоэффициента на мембраната. Определена е стойността на потенциалната разлика, възникваща от двете страни на осцилираща мембрана (т. е. флексоелектричният отговор), като функция на амплитудата и честотата на осцилациите.

Тези приноси се съдържат в публикациите с номера 6, 10, 23, 27 от списъка на публикациите.

#### **5. Термични флуктуациите на формата на квазисферична липидна везикула - теория**

Направена е Монте-Карло симулация на флуктуациите, позволяваща изчисляването на корелациите между амплитудите на модовете, получени при разлагането на термичните флуктуации на формата на квазисферична липидна везикула в ред по сферични функции.

Определени са поправките, дължащи се на флуктуациите, към закона на Лаплас, свързващ напрежението на разтягане на везикулата с разликата в хидростатичните налягания във вътрешността ѝ и вън от нея.

Допълнена е теорията на флуктуациите на формата на квазисферична липидна везикула. За целта са използвани неравенствата на Боголюбов и методът на апроксимацията Хамилтониан.

Отчетено е влиянието на триенето между монослоевите, съставляващи липидния бислой, върху динамиката на флуктуациите на формата на квазисферична липидна везикула.

Тези приноси се съдържат в публикациите с номера 28, 35, 56, 61, 63 от списъка на публикациите.

#### **6. Използуване на термичните флуктуациите на формата на квазисферична липидна везикула за експериментално определяне на коефициента на еластичност на огъване на липиден бислой**

Разработен е експериментален метод за измерване на коефициента на еластичност на огъване на липиден бислой посредством анализ на флуктуациите на формата на квазисферична липидна везикула.

Този принос се съдържат в публикациите с номера 13, 16, 17, 31, 60 от списъка на публикациите.

#### **7. Някои приложения на метода за измерване на коефициента на еластичност на огъване на липиден бислой (виж горния принос)**

Измерен е модулът на еластичност на огъване на мембрани на човешки еритроцити.

Изследвана е зависимостта на модула на еластичност на огъване на липиден бислой от киселинността рН на заобикалящата го водна среда.

Тези приноси се съдържат в публикациите с номера 52, 59 от списъка на публикациите.

#### **8. Зависимост на модула на еластичност на огъване на липиден бислой от температурата в близост до температурата на главния фазов преход**

Обяснено е намаляването на модула на еластичност на огъване на липиден бислой при температури, близки до тази на главния фазов преход и свързаното с него явление „аномално набъбване" (anomalous swelling) в липидно-водни системи.

Този принос се съдържа в публикация с номер 29 от списъка на публикациите.

## 9. Уравнение на формата на затворена мембрана

Изведено е интегро-диференциалното уравнение на формата на затворена течна мембрана. Резултатите, получени за еднослойна мембрана, са използвани за определяне уравнението на формата на липиден бислои.

Този принос се съдържа в публикацията с номер 38 от списъка на публикациите.

## 10. Влияние на незаредени примеси върху механичните свойства на липидния бислои

Определена е зависимостта на модула на еластичност на огъване на липиден бислои, съдържащ примес, от концентрацията на примеса. Доказано е, че амплитудите на флукуациите на формата на квазисферична липидна везикула, чийто бислои съдържа примес, се определят от модула на еластичност на огъване при свободен флип-флоп и на липидните молекули, и на молекулите на примеса. Предложен е нов метод за определяне на коефициента на дифузия на примесни молекули в липидния бислои основаващ се на анализа на термичните флукуации на формата на квазисферична липидна везикула.

Изчислена е теоретично и е измерена експериментално зависимостта на модула на еластичност на огъване на липиден бислои от концентрацията на съдържащия се в него модифициран липид, когато полимерните вериги са в „състояние на четка“.

Доказано е експериментално, че наличието на захари във водния разтвор около липидния бислои силно изменя модулите му на еластичност на огъване и разтягане.

Определена е зависимостта на модула на еластичност на огъване на липиден бислои, съдържащ каналобразуващия пептид аламетицин от концентрацията на пептида. Показано е, че анализът на експерименталните данни позволява да се направи заключение каква е ориентацията на пептида в мембраната при ниски концентрации на пептида.

Изследвана е зависимостта на модула на еластичност на огъване на липиден бислои от концентрацията на холестерол в мембраната.

Тези приноси се съдържат в публикациите с номера 32, 33, 34, 36, 40, 45, 48, 49, 62 от списъка на публикациите.

## 11. Връзка между флексоелектричните, електростатичните и механичните свойства на липидния бислои

Изчислена е връзката между еластичните и флексоелектричните свойства на липидна мембрана. Показано е, че при наличие на флексоелектричен ефект модулите на еластичност на огъване могат да се дефинират при поддържане на нулева потенциална разлика от двете страни на мембраната.

Изследвана е зависимостта на механичните свойства на липиден бислои, съдържащ йонни липиди, от концентрацията им в мембраната. Показано е, че съществуват условия, при които електростатичните взаимодействия водят до фазово разделяне в плоската мембрана.

Направено е измерване на модула на еластичност на огъване на липиден бислои от цвитерйонен липид, съдържащ йонен липид с различни концентрации.

Тези приноси се съдържат в публикациите с номера 19, 20, 24, 46, 50, 51 от списъка на публикациите.

## 12. Механични свойства на липиден бислои, обменящ примесни молекули с течната фаза около мембраната

Изчислен е модулът на еластичност на разтягане на липидна мембрана, съдържаща примес, който е разтворим в течната фаза около мембраната. Определена

е стойност на концентрацията на примеса в мембраната, над която този модул силно намалява.

Този принос се съдържа в публикацията с номер 54 от списъка на публикациите.

### **13. Дефекти в липидния бислой. Връзка със стабилността и свойствата му**

Определена е зависимостта на броя пори в липидния бислой и времето му на живот от неговите площ, ръбна енергия и напрежение на разтягане.

Изследвана е зависимостта на пропускливостта на фосфатидилхолинови мембрани за глюкоза в зависимост от количеството съдържащ се в мембраната простагландин. Резултатите са в много добро съгласие с теоретичен модел, предполагащ че пропускливостта на мембраната е пропорционална на броя пори за единица от нейната площ.

Измерена е водопрпускливостта на липиден бислой, дължаща се на разликата в хидростатичните налягания от двете му страни. Предложено е обяснение на измерената стойност на тази величина, основаващо се на порообразуването.

Изследвани са електричните полета и елестростатичните сили в черна липидна мембрана с проводящ канал в нея, поставена електролит между два електрода. Доказано е, че пертурбацията на електричното поле в такава система се простира на разстояния от канала, които са от порядъка на разстоянието между мембраната и електрода.

Тези приноси се съдържат в публикациите с номера 7, 11, 22, 25, 26, 37, 39, 44, 47 от списъка на публикациите.

### **14. Феноменологично описание на температурни зависимости на термометри и стъкла**

Направено е статистическо достоверно описание на експерименталните измервания на температурата от група сходни платинови термометри в широк температурен интервал. Определена е грешката на измерване на температурата от произволен некалибриран термометър от тази група, ако се използва така направеното описание.

Експериментални резултати за специфичната топлемост на стъкла при ниски температури са описани достоверно посредством феноменологично модифицирания модел на нискоенергетичния потенциал.

Тези приноси се съдържат в публикациите с номера 30 и 55 от списъка на публикациите.

### **15. Вибрационни спектри на тиофосген**

Направено е квантовомеханично изследване на вибрационния спектър и повърхността на потенциалната енергия на основното електронно състояние на тиофосген. Изчислените вибрационни честоти са в добро съгласие с наличните експериментални данни.

Този принос се съдържа в публикацията с номер 53 от списъка на публикациите.

27 октомври 2014 г.

София

Изак Бивас